

Спектральные свойства сверхрешеток Фибоначчи, образованных из графеновых креслообразных нанолент

А.Н. Король^{1,2}, С.И. Литвинчук², С.В. Баглюк², М.В. Лазаренко²

¹Laboratory on Quantum Theory in Linköping, ISIR, P.O., Box 8017, S-580, Linköping, Sweden

E-mail: korolam@ukr.net

²Національний університет пищевых технологий, ул. Владимирская, 68, г. Киев, 01601, Украина

Статья поступила в редакцию 3 ноября 2015 г., после переработки 2 декабря 2015 г., опубликована онлайн 26 января 2016 г.

Рассчитываются и анализируются спектры зависимости коэффициента прохождения T от энергии квазичастиц E одной из разновидностей сверхрешеток (СР) Фибоначчи, созданных на основе графена. СР построена из креслообразных графеновых нанолент (ГНЛ), а квазипериодичность образуется благодаря тому, что в качестве отдельных элементов сверхрешетки использованы металлоподобные (МКГНЛ) и полупроводниковые (ППКГНЛ) ленты, размещенные вдоль оси выращивания решетки в соответствии с последовательностью чисел Фибоначчи. Показано, что различия в значениях поперечно квантованного квазиимпульса электронов в МКГНЛ и ППКГНЛ вполне достаточно для образования эффективной квазипериодической модуляции в рассматриваемой структуре (дополнительных факторов не требуется) и определен оптимальный для этого диапазон ширины нанолент. Проанализирована зависимость спектральных свойств изучаемой структуры от геометрических параметров сверхрешетки, а также от внешнего электростатического потенциала. Обращено внимание, в частности, на то, что в каждой генерации Фибоначчи существует дираковская сверхрешеточная запрещенная зона. Результаты работы могут быть полезны при определении оптимальных параметров устройств наноэлектроники на основе графена.

Розраховуються та аналізуються спектри залежності коефіцієнта проходження T від енергії квазічастинок E одного з різновидів надграток (НГ) Фібоначчі, створених на основі графену. НГ побудована із кріслоподібних графенових нанострічок (ГНС), а квазіперіодичність утворюється завдяки тому, що як окремі елементи надгратки використані металоподібні (МКГНС) й напівпровідникові (ППКГНС) стрічки, розміщені уздовж осі вирощування ґратки відповідно до послідовності чисел Фібоначчі. Показано, що відмінності в значеннях поперечно квантованого квазіімпульсу електронів в МКГНС і ППКГНС цілком достатньо для утворення ефективною квазіперіодичної модуляції в даній структурі (додаткових факторів не потрібно) і визначено оптимальний для цього діапазон ширин нанострічок. Проаналізована залежність спектральних властивостей структури, що вивчається, від геометричних параметрів надгратки, а також від зовнішнього електростатичного потенціалу. Звернуто увагу, зокрема, на те, що в кожній генерції Фібоначчі існує діраківська надграткова заборонена зона. Результати роботи можуть бути корисні для визначення оптимальних параметрів пристроїв наноелектроніки на основі графену.

PACS: 73.21.Cd Сверхрешетки;

72.63.-b Электронный транспорт в наноразмерных материалах и структурах.

Ключевые слова: графен, сверхрешетка Фибоначчи, наноленты, энергетические спектры.

Введение

В последние годы большое внимание уделяется исследованию графена и структур на его основе. Это объясняется нетривиальными свойствами графена, такими как линейный закон дисперсии для квазичастиц,

поведение которых при низких энергиях описывается уравнением, аналогичным уравнению Дирака–Вейля, необычный квантовый эффект Холла, свойство киральности, клейновское туннелирование, высокая подвижность, баллистический транспорт, необычные качества в сверхпроводящем состоянии (в частности, наличие

псевдоспина, \hat{I} — единичная двумерная матрица. Будем нумеровать различные области СР символом ($j = 1, 2, 3, \dots$) и считать, что внутри барьера электростатический потенциал постоянен, т.е. барьеры прямоугольные. Учитывая трансляционную инвариантность решения относительно оси $0y$ и представляя его как сумму плоских волн, движущихся в прямом и обратном направлениях вдоль оси $0x$, решение уравнения (1) для рассматриваемой структуры можно записать в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{A,n}(x) &= a_{j,n} e^{iq_j x} + b_{j,n} e^{-iq_j x}; \\ \Psi_{B,n}(x) &= a_{j,n} g_{j,n}^+ e^{iq_j x} + b_{j,n} g_{j,n}^- e^{-iq_j x} \end{aligned} \quad (2)$$

(в этой и последующих формулах приняты единицы измерения $\hbar = v_F = 1$), верхняя строка относится к графеновой подрешетке A , нижняя — к B , индекс n обозначает номер моды, которая соответствует размерному квантованию поперечного квазиимпульса k_{nj} , закон дисперсии квазиэлектронов имеет вид

$$E = U_j + \sqrt{q_j^2 + k_{jn}^2}, \quad (3)$$

величины $g_{j,n}^\pm$ равны

$$g_{j,n}^\pm = \frac{\pm q_j + ik_{nj}}{E - U_j}. \quad (4)$$

Для металлоподобных графеновых нанолент

$$k_{n,m} = \frac{n\pi}{L_m}, \quad (5)$$

n — целое число, для полупроводниковых

$$k_{n,s} = \frac{\left(n + \frac{1}{3}\right)\pi}{L_s}. \quad (6)$$

Существенная разница в значениях поперечного квазиимпульса для металлоподобных и полупроводниковых элементов решетки (для начальных мод) позволяет предположить, что эта разница может обеспечить эффективную квазипериодическую модуляцию в рассматриваемой системе.

Коэффициент трансмиссии квазиэлектронов сквозь решетку T_n можно найти с помощью метода трансферных матриц, используя технику помодового сшивания собственных функций на границах барьер-яма. Как следует, например, из работы [12], трансферную матрицу, связывающую волновые функции в точках x и $x + \Delta x$ (в частности, $x = 0$, $x + \Delta x = d_m$) можно записать в виде

$$M_j = \begin{pmatrix} \cos(q_j \Delta x) & i \sin(q_j \Delta x) \\ i \sin(q_j \Delta x) & \cos(q_j \Delta x) \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Далее, согласно работе [28], можно предположить, что помодовое сшивание волновых функций не перемешивает отдельные моды. Тогда для каждой моды n для коэффициента прохождения квазиэлектронов $T_n = |t_n|^2$ можно получить

$$t_n = \frac{2}{R_{22,n} + R_{11,n} - R_{12,n} - R_{21,n}} \quad (8)$$

(вывод выражения для коэффициента прохождения приведен в работе [12]). Матрица R выражается через произведение матриц M_j следующим образом:

$$R = \prod_{j=1}^N M_j,$$

где N — общее число элементов в сверхрешетке. Области энергий, для которых $T_n \approx 1$, образуют разрешенные зоны, а запрещенным зонам соответствуют значения $T_n \ll 1$.

Полученные результаты

На рис. 2 изображена зависимость величины $\log T_1$ от энергии E для четвертой генерации Фибоначчи рассматриваемой СР на основе креслообразных графеновых нанолент с параметрами $L_m \approx 36,9$ нм, $L_s \approx 35,18$ нм, $d_m \approx 16,24$ нм, $d_s \approx 15,74$ нм, $w \approx 32,48$ нм, внешний потенциал равен нулю, $n = 1$, т.е. представлен спектр для первой моды (для удобства геометрические размеры приводятся в нанометрах, а энергия — в электрон-вольтах). В спектре наблюдается четкая тенденция к группированию спектральных зон в отдельные ячейки, и в целом спектр имеет выраженный периодический характер. Заметим, что плотность спектральных линий (например, максимумов) в данном фиксированном интервале энергий возрастает с увеличением ширины эле-

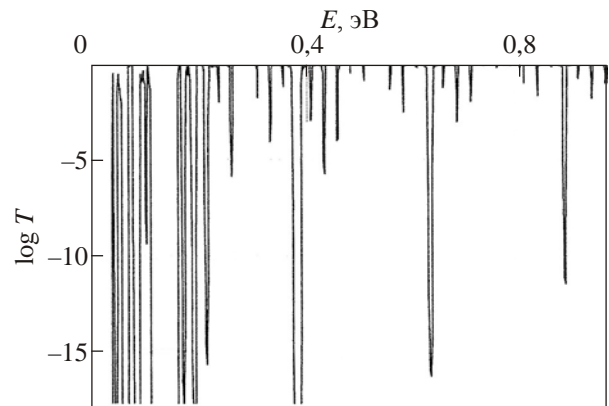


Рис. 2. Зависимость коэффициента трансмиссии T от энергии E для четвертой генерации Фибоначчи рассматриваемых сверхрешеток.

ментов m или s . С ростом энергии происходит сужение запрещенных зон, так что коэффициент трансмиссии асимптотически стремится к единице. Это сужение, однако, не является монотонным, а «угасание спектра» имеет волнообразный характер, в чем, в частности, проявляется свойство самоподобия спектров Фибоначчи в данной системе (как, например, в работе [18]).

Итак, в спектрах существуют отдельные участки, структура которых периодически повторяется по всей шкале энергии — условно каждый из этих фрагментов спектра можно считать его периодом. В спектре можно выделить периоды меньшей и большей величины и для анализа выбрать один из периодов. Спектры, аналогичные представленному на рис. 2, реализуются и для других секвенций Фибоначчи. Количество зон в каждом периоде, ширина каждой из них существенно зависит, с одной стороны, от параметров СР, с другой — от номера итерации Фибоначчи.

Хорошо известно, что спектральные свойства сверхрешеток удобно регулировать с помощью внешнего электростатического потенциала U . Будем считать, что такой потенциал различной величины приложен как к элементам СР m : U_m , так и к элементам s : U_s . Известно также, что широкие щели (и их наибольшее количество) образуются в сверхрешетках в окрестности потолка потенциального барьера U . Это, в частности, подтверждается и для рассматриваемой в данной работе системы, о чем свидетельствует рис. 3, на котором изображен трансмиссионный спектр для 4-й генерации Фибоначчи со значениями потенциалов $U_m = 0,4$ эВ, $U_s = 1,6$ эВ, остальные параметры $L_m \approx 36,9$ нм, $L_s \approx 35,18$ нм, $d_m \approx 16,24$ нм, $d_s \approx 15,74$ нм, $w = d_m$, $n = 1$. Мы приняли значения U_s и U_m , существенно отличающиеся друг от друга, — в этом случае образуются две группы спектральных линий, скапливающиеся около взятых значений электростатического потенциала. При сближении значений U_s и U_m указанные группы спектральных линий тоже сближаются и, в конце концов, перекрываются; при этом запрещенные зоны расширяются.

Спектры высших поколений Фибоначчи сильно фрагментированы, степень фрагментации заметно воз-

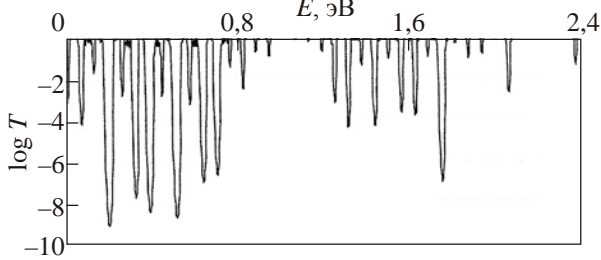


Рис. 3. Зависимость коэффициента трансмиссии T от энергии E для четвертой секвенции Фибоначчи в случае разных значений потенциалов U_m и U_s .

растает с увеличением геометрических параметров решетки d_s , d_m . С ростом номера секвенции Фибоначчи количество щелей растет, и их суммарная ширина тоже увеличивается.

На рис. 4 приведена след-карта спектров разновидности рассматриваемых СР с $w = 0$ для начальных генераций Фибоначчи в интервале энергии, равном минимальному периоду СД, для следующих параметров: $L_m \approx 29,5$ нм, $L_s \approx 24,1$ нм, $d_m \approx 16,24$ нм, $d_s \approx 15,74$ нм, внешний потенциал $U = 0,5$ эВ, $n = 1$. Сплошным отрезкам линий отвечают зоны разрешенных энергий, между ними находятся запрещенные зоны, у вертикальной оси указаны номера генераций Фибоначчи.

Видно, что спектры имеют четко выраженный фрактальный характер. Расщепление разрешенных зон, начиная с третьего поколения, происходит в соответствии со свойством самоподобия спектров Фибоначчи. Заметим, что независимо от значений L_s , L_m в спектрах существуют участки с одинаковыми запрещенными значениями энергии во всех поколениях. Количество зон в минимальном энергетическом периоде СД подчиняется правилу Фибоначчи: $z_N = z_{N-1} + z_{N-2}$, где z_N — количество зон в N -й секвенции. Для параметров рис. 4 последовательность чисел z_N для начальных поколений такова: 2, 6, 8, 14... Подчиненность числа зон правилу Фибоначчи свойственна и большим периодам спектров, но со своим набором значений z_N для каждого данного периода.

Известно, что в спектре графеновой сверхрешетки может образоваться специфическая дираковская сверхрешеточная щель (см., например, [11,12]). Она имеет особое значение, в частности, из-за того, что является нечувствительной к неупорядоченности геометрических параметров решетки [12,13]. Положение середины этой щели можно найти, воспользовавшись условием

$$\cos(kl_N) = \frac{1}{2} \text{Tr}(M_N), \quad (9)$$

где k — блоховский квазиимпульс, l_N — период решетки для N -й генерации Фибоначчи, M_N — матрица, равная произведению трансферных матриц, соответствующих элементам СР, образующих данную генерацию,

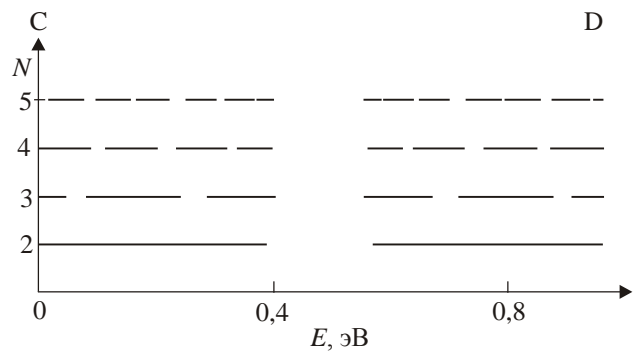


Рис. 4. След-карта начальных итераций Фибоначчи для СР со значением $w = 0$.

например, для третьего поколения $M_3 = M_m M_s M_m$. (см. [12]). Для произвольной генерации Фибоначчи N из формулы (9) можно получить для E_{D_N}

$$E_{D_N} = \frac{U_m \delta_N d_m + U_s d_s}{\delta_N d_m + d_s}, \quad (10)$$

где $\delta_N = N_m / N_s$, N_m, N_s — количество соответствующих элементов в данной генерации. Если $U_s \approx U_m = U$, $d_s \approx d_m$, то величина E_{D_N} не зависит от N и равна U . Очевидно, что, поскольку с ростом N величина δ_N стремится к определенному постоянному значению, величина E_{D_N} может заметно зависеть от номера генерации только для начальных секвенций, а для высших генераций E_{D_N} практически не зависит от N . Для параметров рис. 4 величина $E_D \approx U = 0,5$ эВ. Характерным признаком сверхрешеточной дираковской зоны является то, что ее положение нечувствительно к периоду решетки. Это утверждение справедливо для обоих рассматриваемых в данной работе видов сверхрешеток: с $w = 0$ и $w \neq 0$. Рисунок 5, на котором изображен спектр четвертого поколения Фибоначчи, показывает, что при изменении периода дираковская щель остается на месте, а другие (брэгговские) сдвигаются; сплошной линии соответствует значение периода решетки $(d_m + w)$, равное 48,1 нм, пунктирной — 32,1 нм, $L_m \approx 36,9$ нм, $L_s \approx 35,2$ нм.

Кратко проанализируем некоторые особенности спектров рассматриваемых сверхрешеток с фиксированными квантовыми ямами, т.е. таких, в которых между элементами m и s (к ним приложены потенциалы U_m и U_s соответственно) существует область с нулевым потенциалом — квантовая яма с конечной шириной $w \neq 0$. Заметим, что в этих СР образуются резонансные состояния трех типов: барьерные, «ямные» и смешанные [21,22]. В таком случае в полученные выше результаты следует внести некоторые поправки. Так, в данном фиксированном энергетическом интервале (например, в данном периоде спектра) увеличивается ко-

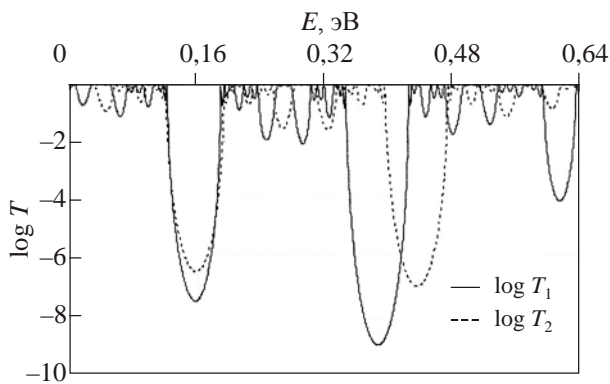


Рис. 5. Трансмиссионный спектр для четвертого поколения Фибоначчи для разных значений периода сверхрешетки d : величинам T_1 и T_2 отвечают значения $d_1 \approx 48,1$ нм и $d_2 \approx 32,1$ нм соответственно.

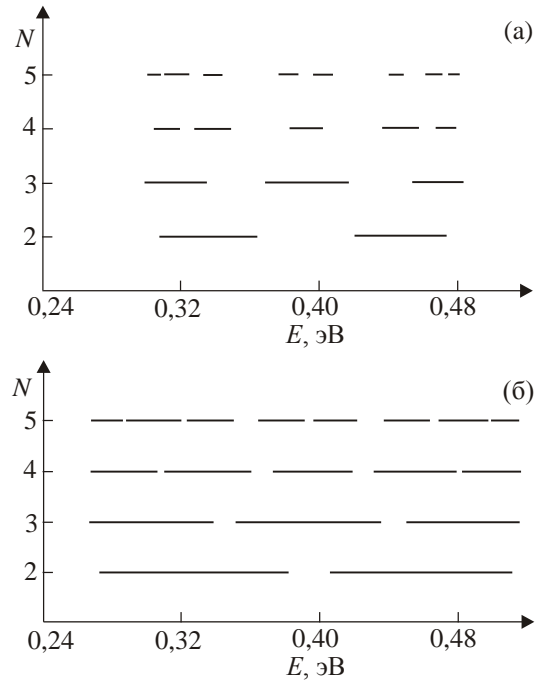


Рис. 6. След-карта начальных генераций Фибоначчи для СР ($w = d_m$) с разными ширинами нанолент: $L_m \approx 36,9$ нм; $L_s \approx 35,2$ нм (а); $L_m \approx 29,5$ нм; $L_s \approx 24,1$ нм (б).

личество зон, к тому же их количество существенно возрастает с увеличением ширины квантовой ямы. Соответственно, набор чисел z_N в каждом периоде спектра меняется. Положение дираковской зоны также меняется, и в случае приблизительного равенства ширины квантовой ямы и барьеров $E_D \approx U/2$. Заметим, что с ростом ширины квантовой ямы величина сверхрешеточной дираковской зоны уменьшается, но соседние щели расширяются.

На рис. 6 приведены след-карты СР с параметрами: $L_m \approx 36,9$ нм, $L_s \approx 35,2$ нм (а), $L_m \approx 29,5$ нм, $L_s \approx 24,1$ нм (б), другие параметры для этих рисунков одинаковы: $d_m \approx 16,24$ нм, $d_s \approx 15,74$ нм, $w = d_m$, внешний потенциал $U = 0,5$ эВ, $n = 1$. Количество зон в данном энергетическом интервале подчиняется инфляционному правилу Фибоначчи и для начальных секвенций равно 2, 3, 5, 8... Характер след-карт на рис. 6(а) и 6(б) одинаков, но ширина разрешенных (запрещенных) зон существенно зависит от значений ширины нанолент L_m и L_s .

Заключение

В работе рассчитан коэффициент трансмиссии квазиэлектронов сквозь сверхрешетку Фибоначчи, построенную из креслообразных полупроводниковых и металлоподобных графеновых нанолент, и представлены спектры трансмиссии для начальных генераций Фибоначчи. Эти спектры существенно зависят от размера лент в поперечном к цепи решетки направлении L . Оптимальные значения L для первой спектральной моды

лежат в диапазоне нескольких десятков нанометров. Спектры проявляют свойство периодичности в зависимости от энергии квазиэлектронов; зоны разрешенных (запрещенных) значений энергий группируются в отдельные ячейки, структура которых периодически повторяется. Количество энергетических зон в пределах отдельных периодов подчиняется закону чисел Фибоначчи. Спектры также существенно зависят от внешнего электростатического потенциала, приложенного к элементам СР. В каждой генерации Фибоначчи существуют дираковские сверхрешеточные щели, положение которых регулируется геометрическими параметрами решетки, а также значением электростатического потенциала.

1. A.K. Geim and K.S. Novoselov, *Nat. Materials* **6**, 183 (2007).
2. A.N. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
3. J.M. Pereira, F.M. Peeters, A. Chaves, M. Barbier, and P. Vasilopoulos, *Semicond. Science Technology* **25**, 033002 (2010).
4. V.V. Cheianov, and V.I. Falko, *Phys. Rev. B* **74**, 041403 (2006).
5. C.W.J. Beenakker, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 067007 (2006).
6. L. Brey and H.A. Fertig, *Phys. Rev. B* **73**, 235411 (2006).
7. K. Wakabayashi, K. Sasaki, T. Nakanishi, and T. Enoki, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **11**, 054504 (2010).
8. R. Tsu, *Superlattice to Nanoelectronics* (2nd ed.), Elsevier, Oxford (2011), 327 p.
9. Q. Zhao, J. Gong, and C.A. Muller, *Phys. Rev. B* **85**, 104201 (2012).
10. M. Barbier, P. Vasilopoulos, and F.M. Peeters, *E-print archives, cond-mat/1101.4117 V1* (2011).
11. L. Wang and X. Chen, *E-print archives, cond-mat. Mes-hall/1008.0504, V1* (2010).
12. L. Wang and S. Zhu, *Phys. Rev. B* **81**, 205444 (2010).
13. V.H. Nguyen, A. Bourmel, and P. Dollfus, *Semicond. Sci. Technol.* **26**, 125012 (2011).
14. M. Barbier, P. Vasilopoulos, and F.M. Peeters, *Phys. Rev. B* **80**, 205415 (2009).
15. P. Zhao and X. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 182108 (2011).
16. T. Ma, C. Liang, L. Wang, and X. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 252401 (2012).
17. Yu.P. Bliokh, V. Freilikher, S. Savel'ev, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **79**, 075123 (2009).
18. А.Н. Король, В.Н. Исай, *ФТТ* **55**, 2468 (2013).
19. А.Н. Король, *ФНТ* **40**, 324 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 251 (2014)].
20. А.М. Korol, V.M. Isai, and N.V. Medvid', *Proceedings of the IEEE 34th International Scientific Conference, Kyiv 2014*, p. 235.
21. П.В. Ратников, А.П. Силин, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 349 (2014).
22. W.-Y. Deng, R. Zhu, Y.-C. Xiao, and W.-J. Deng, *Chin. Phys. B* **23**, 017202 (2014).
23. Z. Cheng, R. Savit, and R. Merlin, *Phys. Rev. B* **37**, 375 (1988).
24. E. Macia, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 036502 (2012).
25. J.M. Luck, *Phys. Rev. B* **39**, 5834 (1989).
26. M. Kolar, M.K. Ali, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **43**, 1034 (1991).
27. N. Liu, *Phys. Rev. B* **55**, 3543 (1997).
28. J. Tworzydło, B. Trauzettel, M. Titov, A. Rycerz, and C.W.J. Beenakker, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 246802 (2006).

Spectral properties of the Fibonacci superlattices created of the graphene armchair nanoribbons

A.M. Korol, S.I. Litvynchuk, S.V. Bagliuk, and M.V. Lazarenko

The spectra of the dependence of the transmission coefficient T on a quasiparticle energy E for one of kinds of the graphene-based Fibonacci superlattices (SL) are calculated and analyzed. The SL is built of the armchair graphene nanoribbons (GNR) and the quasiperiodicity is formed due to the fact that the metal-like (MGNR) and the semiconductor (SCGNR) ribbons, placed along the lattice growth axis in accordance with the Fibonacci numbers, are used as individual elements of the SL. It is shown that the difference in values of the quantized transverse quasimomentum of electrons in MGNR and SCGNR is sufficient to form an effective quasiperiodic modulation in the given structure, and the range of the ribbon widths for this purpose is determined. The dependence of the spectral properties of the studied structure on the geometric parameters of the superlattice as well as on the external electrostatic potential is analyzed. Attention is drawn in particular that in each Fibonacci generation there is the Dirac superlattice gap. The obtained results can be used to determine the optimal parameters of the graphene-based nanoelectronics devices.

PACS: 73.21.Cd Superlattices;
72.63.-b Electronic transport in nanomaterials and nanostructures.

Keywords: graphene, Fibonacci superlattice, nanoribbons, energy spectra.